

Lista de Exercícios IX

① As forças de van der Waals entre dois átomos neutros são causadas pelas interações entre momentos de dipolo induzidos. Vamos avaliar no caso de dois átomos de hidrogênio no seu estado fundamental $|0\rangle$.

(a) Os prótons dos dois átomos de hidrogênio se encontram a uma distância $R \gg a_0$, a_0 sendo o raio de Bohr; \mathbf{R} é o vetor que aponta do próton 1 ao próton 2 e o eixo Oz é orientado seguindo \mathbf{R} . Definimos \mathbf{r}_1 o vetor que aponta do elétron 1 ao próton 1, \mathbf{r}_2 o vetor que aponta do elétron 2 ao próton 2 e $\mathbf{d}_i = q\mathbf{r}_i$ é o momento de dipolo elétrico do átomo i . Mostre que na física clássica a energia de interação dos dois dipolos é

$$\begin{aligned} W &= \frac{e^2}{R^3} \left[\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 - 3(\mathbf{r}_1 \cdot \hat{\mathbf{R}})(\mathbf{r}_2 \cdot \hat{\mathbf{R}}) \right] \\ &= \frac{e^2}{R^3} [x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2] . \end{aligned}$$

(b) Para obter a expressão quântica de W , utilizamos o princípio de correspondência e substituindo os números x_1, \dots, z_2 pelos operadores X_1, \dots, Z_2

$$W = \frac{e^2}{R^3} [X_1X_2 + Y_1Y_2 - 2Z_1Z_2] ,$$

Mostre que o autovalor esperado de W é nulo em primeira ordem de teoria de perturbação, isto é, que $\langle 0_10_2|W|0_10_2\rangle = 0$.

(c) Em segunda ordem, se $|\alpha\rangle$ representa um estado excitado ou um estado do contínuo de energia E_α

$$E_2 = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{|\langle \alpha_1\alpha_2|W|0_10_2\rangle|^2}{-2R_\infty - E_{\alpha_1} - E_{\alpha_2}}$$

onde R_∞ é a constante de Rydberg. Para obter uma ordem de grandeza de E_2 , ignoramos E_{α_1} e E_{α_2} no denominador. Deduzimos que

$$E_2 \sim -6 \frac{e^2}{R} \left(\frac{a_0}{R}\right)^5 .$$

A energia de interação varie com R^{-5} e a força como R^{-6} . Mostre que a estimativa precedente não é válida se $R \gtrsim \hbar c/R_\infty$. Para distâncias $R \gg \hbar c/R_\infty$, mostre que a força se comporta como R^{-7} .

② O deuteron tem spin 1, momento magnético $0.857\mu_N$, e momento de quadrupolo elétrico 0.28 fm^2 . Avalie e faça um gráfico dos desvios de estrutura hiperfina para os níveis $n = 2$ do deutério.

③ Vamos discutir aqui o efeito Stark no multiplete $n = 2$ do átomo de hidrogênio. Como o *desvio de Lamb* é pequeno comparado ao desvio causado pela estrutura hiperfina, o espectro possui várias características interessantes.

(a) Calcule os elementos de matriz de eEz na base que diagonaliza H_{ef} (estrutura fina). Mostre que para $|m| = \frac{3}{2}$ os estados não são afetados, enquanto que as energias perturbadas e autoestados do espaço $|m| = \frac{1}{2}$ podem ser encontrados diagonalizando

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}\mathcal{E} & 0 \\ \sqrt{3}\mathcal{E} & \Delta_1 & -\sqrt{6}\mathcal{E} \\ 0 & -\sqrt{6}\mathcal{E} & \Delta_2 \end{pmatrix},$$

onde $\mathcal{E} \equiv eEa_0$, $\Delta_1 = E(s_{\frac{1}{2}}) - E(p_{\frac{1}{2}})$, $\Delta_2 = E(p_{\frac{3}{2}}) - E(p_{\frac{1}{2}})$.

(b) \mathcal{H} pode ser diagonalizado exatamente, mas é mais instrutivo encontrar as energias em dois limites: quando as perturbações elétrica são pequenas ou grandes em comparação com a separação de estrutura fina. Considere o primeiro caso e mostre que os desvios dos níveis são quadráticos em \mathcal{E} quando $\mathcal{E} \ll \Delta_1$, mas lineares em \mathcal{E} para $\mathcal{E} \gg \Delta_1$ (sempre com $\mathcal{E} \ll \Delta_2$). Mostre que o desvio quadrático do estado $p_{\frac{3}{2}}$ também pode ser encontrado facilmente usando teoria de perturbação.

(c) Finalmente, considere o limite de campo forte $\mathcal{E} \gg \Delta_2$. Aqui precisamos tomar cuidado para manter o zero de energia correto. Para garantir isso note que $\text{Tr } \mathcal{H}$ é sempre o mesmo qualquer que seja o valor de \mathcal{E} , incluindo $\mathcal{E} = 0$. Usando esse fato e escrevendo os autovalores para campos elevados como $\delta E + (\Delta_1 + \Delta_2)/3$, mostre que $\delta E = 0, \pm 3\mathcal{E}$.

- ④ Calcule o efeito Zeeman quadrático para o estado fundamental do átomo de hidrogênio devido ao termo usualmente ignorado no Hamiltoniano de interação: $e^2 \mathbf{A}^2 / 2m_e c^2$ (termo diamagnético). Escreva o desvio da energia como

$$\Delta = -\frac{1}{2} \chi \mathbf{B}^2,$$

e obtenha uma expressão para a suscetibilidade magnética χ .

- ⑤ Considere um átomo arbitrário com estado fundamental, $|0\rangle$, não degenerado com $J = 0$ colocado em um campo elétrico uniforme \mathbf{E} . O momento de dipolo elétrico induzido D pode ser encontrado de duas formas: (i) a partir da energia do estado fundamental como função de E ; (ii) por um cálculo direto do momento de dipolo no estado no estado fundamental perturbado. Mostre que ambos os métodos levam a mesma expressão para D :

$$D = 2e^2 E \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | X | n \rangle|^2}{E_n - E_0},$$

onde $X = \sum_i x_i$, e E_n são as energias dos estados estacionários não perturbados $|n\rangle$.

- ⑥ Considere o átomo He com $Z = 2$ e dois elétrons. O Hamiltoniano que descreve o sistema é

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}},$$

onde r_1 , r_2 são as distâncias entre os núcleos e os dois elétrons e r_{12} é a distância entre os dois elétrons.

- (a) Trate a interação entre os elétrons como uma perturbação. Encontre uma estimativa para o estado fundamental do sistema.
- (b) Admita que a função de onda do estado fundamental possa ser representada pela função de prova

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z'^3}{\pi} e^{-Z'(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)},$$

estime agora a energia do estado fundamental usando o método variacional, onde Z' é o parâmetro variacional.

- (c) Compare os valores que você encontrou com o valor experimental -78.6 eV.
- (d) Estime o valor dos estados fundamentais de Li^+ e Be^{++} cujos valores experimentais são, respectivamente, -197.1 eV e -370 eV.